

ИССЛЕДОВАНИЕ ХИМИИ СВЕРХТЯЖЕЛЫХ ЭЛЕМЕНТОВ: НЕЭМПИРИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ

А.В. Титов¹, Н.С. Мосягин¹, А.Н. Петров¹, А.В. Зайцевский²

¹ ПИЯФ РАН, г. Гатчина

² ИВЭПТ, РНЦ «Курчатовский институт», г. Москва

Современные неэмпирические (*ab initio*) релятивистские методы расчета электронной структуры рассматриваются с точки зрения возможности их применения к прецизионному исследованию физико-химических свойств сверхтяжелых элементов (СТЭ) и их соединений. В докладе анализируются современные варианты релятивистских псевдопотенциалов (РПП) в применении к расчетам соединений СТЭ, такие как радиально-локальные (полулокальные) и сепарабельные, а также псевдопотенциалы Фудзинаги. Показано, что все эти варианты могут быть объединены в рамках «обобщенного» метода РПП с учетом их особенностей и достоинств. Современные РПП позволяют достигать практически любой заданной точности расчета соединений (сверх)тяжелых элементов, лантаноидов и актиноидов при минимальных вычислительных издержках (точность ограничивается на практике возможностями методов учета электронной корреляции).

Вкратце рассматриваются и наиболее эффективные из современных подходов для учета электронных корреляций: теория релятивистских связанных кластеров (РСК) и метод конфигурационного взаимодействия (КВ). Эти подходы показали свою высокую эффективность в многочисленных расчетах атомов и молекул, они хорошо дополняют друг друга в смысле оптимальных областей их применения. Метод РСК позволяет наилучшим образом описывать *динамические* корреляции («кулоновские дырки» и т.п.), а метод КВ, в свою очередь, оптимален для описания *нединамических* корреляций, что важно, в частности, для описания квазипересечения электронных термов. В отличие от теории функционала плотности, методы РСК и КВ позволяют с высокой точностью исследовать электронно-возбужденные состояния атомов и молекул, а также дисперсионные взаимодействия.

Представлены результаты расчетов соединений элементов 112 (eka-Hg), 114 (eka-Pb) и 104 (Rf); анализируется роль электронных корреляций и релятивистских (спин-орбита) эффектов, а также отмечена важность тщательной оптимизации атомных базисов. Неэмпирические релятивистские расчеты с высоким уровнем учета электронных корреляций наиболее эффективны в применении к малым системам, и по полученным данным может быть выполнена калибровка обменно-корреляционных функционалов для последующих расчетов многоатомных систем и кластеров, содержащих СТЭ, методом функционала плотности.

Работа поддержана грантами РФФИ № 07-03-01139-а и 09-03-00655-а.